

ФИЗИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ В ЭЛЕКТРОННЫХ ПРИБОРАХ

УДК 538.911

ВЛИЯНИЕ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЙ ОРИЕНТАЦИИ НА ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД КОНЕЧНОЙ ПЛАСТИНЫ ИЗ СПЛАВА С ЭФФЕКТОМ ПАМЯТИ ФОРМЫ TiNi¹

© 2023 г. А. И. Павлов^{a, *}, А. И. Карцев^{b, c}, В. В. Коледов^d, П. В. Лега^{b, d}

^a Московский государственный университет им. Н.Э. Баумана,
ул. 2-я Бауманская, 5, стр. 4, Москва, 105005 Российская Федерация

^b Российский университет дружбы народов,
ул. Миклухо-Маклая, 6, Москва, 117198 Российская Федерация

^c Вычислительный центр ДВО РАН, ул. Ким Ю Чена, 65, Хабаровск, 680000 Российская Федерация

^d Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН,
ул. Моховая, 11, корп. 7, Москва, 125009 Российская Федерация

*E-mail: Alex.pav.2001@yandex.ru

Поступила в редакцию 17.05.2023 г.

После доработки 17.05.2023 г.

Принята к публикации 25.05.2023 г.

Проведено моделирование пластины из сплава с памятью формы TiNi при различных кристаллографических ориентациях с помощью свободного пакета для классической молекулярной динамики LAMMPS. Выяснено, что кристаллографическая ориентация пластины оказывает существенное влияние на температуру фазового перехода. Построена зависимость поверхностной энергии от температуры при кристаллографических ориентациях (100), (110), (112), (122). Исследована устойчивость используемой модели, в результате чего подтверждена ее применимость в данных расчетах.

DOI: 10.31857/S0033849423100133, EDN: DOCWBT

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время большой интерес для науки и техники представляют сплавы с эффектом памяти формы (ЭПФ), которые применяются в ряде различных областей, таких как авиастроение, ракетостроение, наноприборостроение и др. [1]. Также сплавы с эффектом памяти формы активно используются в медицине [2].

В 1990 годах были синтезированы углеродные нанотрубки и обнаружены их необыкновенные функциональные свойства [3, 4]. С тех пор было синтезировано множество различных нанообъектов [5], таких, например, как нанопровода, и на их основе была создана концепция единичных устройств. Однако для создания как наноприборов, так и микроустройств требуется инструмент, с помощью которого можно было бы осуществлять наноманипуляции, чтобы объединить отдельные наноэлементы в наноприборостроение, а затем и в микроустройства или чипы из этих наноприборов [6–8]. Таким инструментом, например, является нанопинцет, который создается на основе сплавов с памятью формы. Однако возникает прикладная проблема ограничения на минимальные

размеры наномеханического устройства с ЭПФ, связанное с размерными эффектами при переходе на наноразмер.

Исследования сплавов с ЭПФ имеют большую ценность еще и потому, что расширяют знания о фундаментальных свойствах конденсированного состояния вещества и фазовых переходах на такую важную область как наномасштаб.

Также ряд других теоретических и экспериментальных работ посвящены изучению фазовых переходов в клиновидных и конических образцах, например, [9, 10].

Цель данной работы – исследовать размерные эффекты и их влияние на фазовый переход в нанопластинах с ЭПФ на основе TiNi методом молекулярной динамики.

1. ОПИСАНИЕ МЕТОДА

Сплав TiNi моделировали с использованием эмпирических методов расчета потенциалов с помощью свободного пакета для классической молекулярной динамики LAMMPS. Расчеты проводили на ресурсах Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН (МСЦ РАН). Ovito был применен для визуализации процессов диффузии и кристаллических структур.

¹ Работа удостоена премии на 19-м конкурсе молодых ученых имени Ивана Анисимкина.

Молекулярная динамика (МД) – это широко используемый метод компьютерного моделирования для изучения движения атомов или молекул в сложной системе. Для определения траекторий движения молекул или атомов используются классические механические уравнения Ньютона, основанные на межатомных потенциалах между частицами. Процесс моделирования можно кратко описать следующим образом.

Классическое уравнение Ньютона имеет вид

$$\vec{F} = m\vec{a}. \quad (1)$$

Метод МД заключается в интегрировании уравнений движения Ньютона по времени для получения временной эволюции системы и свойств, интересующих нас:

$$\vec{F} = m\vec{a} = m \frac{d\vec{v}}{dt} = m \frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = \frac{d\vec{p}}{dt}. \quad (2)$$

Если полная энергия E постоянна во времени ($dE/dt = 0$), что имеет место в случае изолированной системы для МД-моделирования, то F связана с отрицательным градиентом потенциала по отношению к положению

$$F = -\nabla U(r_1, r_2, \dots, r_N), \quad (3)$$

где U – потенциал.

Рассмотрим полную силу системы из N атомов в терминах полного набора из $3N$ атомных координат:

$$F(r_1, r_2, \dots, r_N) = \sum_i m_i a_i = \sum_i m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2}. \quad (4)$$

Сила на атоме i может быть получена из отрицательной производной потенциальной энергии по отношению к положению, если энергия сохраняется ($dE/dt = 0$), что имеет место в большинстве МД-симуляций. Теперь у нас есть практическое уравнение для МД:

$$F_i = m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} = -\frac{dU(r_i)}{dr_i}, \quad (5)$$

Скоростной алгоритм Верле является одним из наиболее часто реализуемых методов в МД. В этой схеме положения, скорости и ускорения в момент времени $t + \Delta t$ получаются из соответствующих величин в момент времени t следующим образом.

1. Вычисляем v на полшаге и r на полный шаг, используя половину шага v :

$$v\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = v(t) + \frac{1}{2!} a(t) \Delta t, \quad (6)$$

$$\begin{aligned} r(t + \Delta t) &= r(t) + v(t) \Delta t + \frac{1}{2!} a(t) \Delta t^2 = \\ &= r(t) v\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) \Delta t. \end{aligned} \quad (7)$$

2. Вычислим a на полном шаге из соотношения потенциалов:

$$a(t + \Delta t) = -\frac{1}{m} \frac{dU[r(t + \Delta t)]}{dr} = \frac{F(t + \Delta t)}{m}. \quad (8)$$

3. Вычислим v на полном шаге от a в предыдущий и текущий моменты времени и выразим это с помощью v на полшаге и a на полном шаге:

$$\begin{aligned} v(t + \Delta t) &= v(t) + \frac{a(t) + a(t + \Delta t)}{2} \Delta t = \\ &= v\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) + \frac{1}{2} a(t + \Delta t) \Delta t. \end{aligned} \quad (9)$$

4. Поверхностную энергию рассчитывали по формуле

$$\sigma = \frac{E_{\text{конеч}}^{\text{нерел}} - E_{\text{объем}}}{2S} + \frac{E_{\text{конеч}}^{\text{рел}} - E_{\text{конеч}}^{\text{нерел}}}{S}, \quad (10)$$

где $E_{\text{конеч}}^{\text{нерел}}$ – полная энергия нерелаксированной конечной пластины, $E_{\text{объем}}$ – полная энергия данной пластины в объеме, $E_{\text{конеч}}^{\text{рел}}$ – полная энергия отрелаксированной конечной пластины

В данной работе был использован потенциал взаимодействия TiNi, разработанный на основе модифицированного метода вложенного атома с помощью машинного обучения [11].

2. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Одним из способов проверки устойчивости модели является контроль величины полной энергии. Задача состоит в том, чтобы выяснить, имеется ли дрейф полной энергии. Если дрейфа полной энергии нет во временном масштабе, значительно превышающем время релаксации температуры, то можно считать, что данная модель устойчива.

Далее приведена оценка устойчивости модели нанопластины с временем релаксации 1000 фс. Шаг по времени составляет 1 фс. Кристаллографическая ориентация нанопластины выбрана (100).

На рис. 1 и 2 на всем временном интервале, составляющем 0.3 нс, происходят незначительные колебания полной энергии вокруг некоторой средней величины, составляющие менее 0.01% от величины полной энергии, что нас устраивает. Таким образом, мы имеем возможность использовать модель в решении нашей задачи.

Моделирование проводилось при следующих параметрах:

– размер ячейки моделирования $x = y = 15 \text{ \AA}$, $z = 150 \text{ \AA}$;

– выбранные кристаллографические ориентации (100), (110), (112), (122);

– шаг по времени был выбран равным 1 фс, время релаксации температуры – 1000 фс;

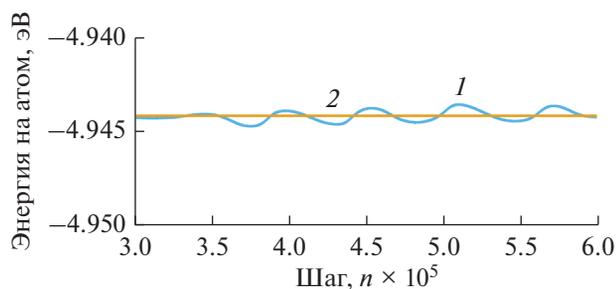


Рис. 1. Оценка устойчивости модели при $T = 300$ К с кристаллографической ориентацией (100): 1 – зависимость полной энергии на атом от номера шага моделирования; 2 – усредненное значение полной энергии на атом за выбранное количество шагов.

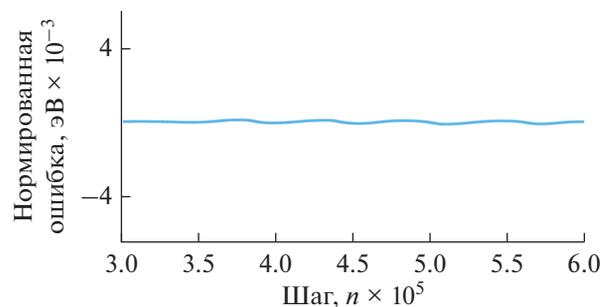


Рис. 2. Зависимость нормированного отклонения полной энергии на атом от номера шага моделирования при $T = 300$ К с кристаллографической ориентацией (100).

– параметр решетки 3.049 \AA (экспериментальное значение) [12];

– система приводится к равновесию с помощью термостата Нозе–Гувера и баростата Парринелло–Рахмана [13, 14];

– периодические граничные условия были применены в двух измерениях, в то время как искусственное незаполненное пространство было введено вдоль третьего направления, чтобы смоделировать поверхность;

– на первоначально сгенерированных ячейках применялся процесс минимизации энергии для позиций атомов методом сопряженного градиента;

– все расчеты проводились с радиусом отсечения 5.0 \AA , что больше радиуса второй координационной сферы (больше чем расстояние до вторых ближайших соседей в В2-структуре сплава TiNi).

На рис. 3–6 изображены ячейки моделирования, в рамках которых проводился расчет.

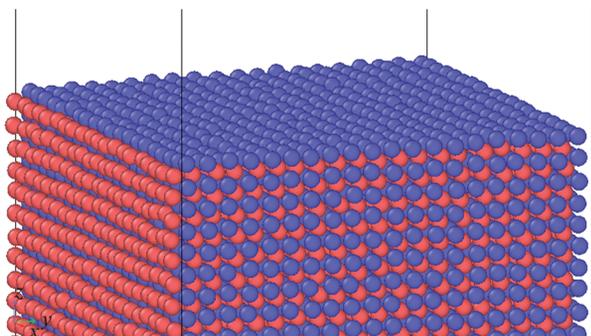


Рис. 3. Ячейка, в рамках которой производилось моделирование тонкой пластины с кристаллографической ориентацией (100).

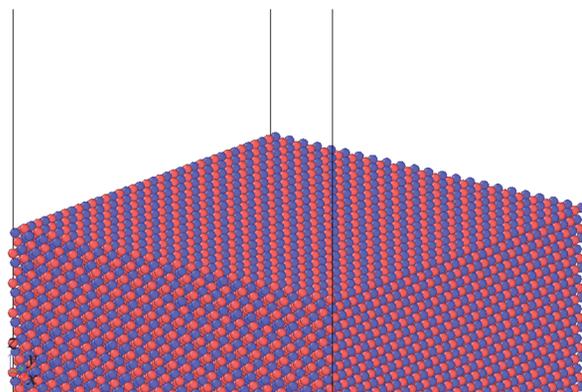


Рис. 5. Ячейка, в рамках которой производилось моделирование тонкой пластины с кристаллографической ориентацией (112).

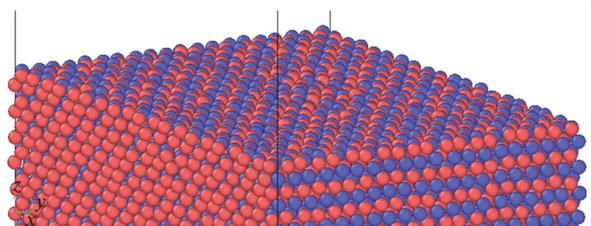


Рис. 4. Ячейка, в рамках которой производилось моделирование тонкой пластины с кристаллографической ориентацией (110).

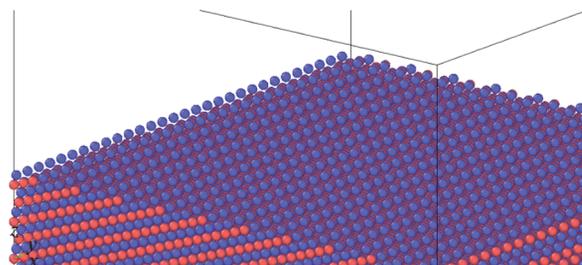


Рис. 6. Ячейка, в рамках которой производилось моделирование тонкой пластины с кристаллографической ориентацией (122).

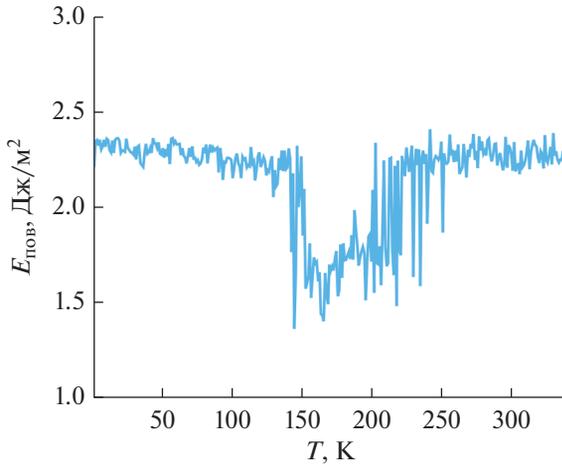


Рис. 7. Зависимость поверхностной энергии $E_{\text{пов}}$ от температуры T при кристаллографической ориентации (100).

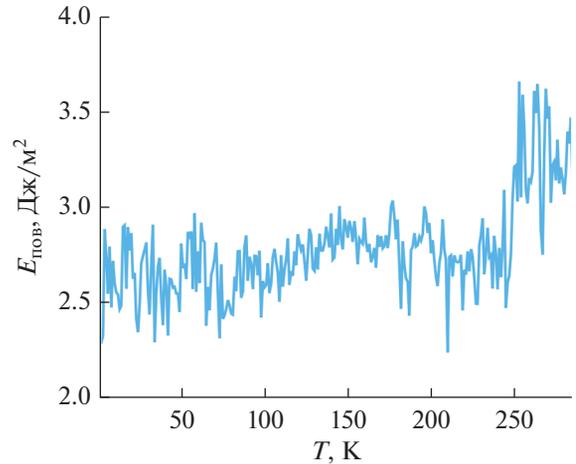


Рис. 8. Зависимость поверхностной энергии $E_{\text{пов}}$ от температуры T при кристаллографической ориентации (110).

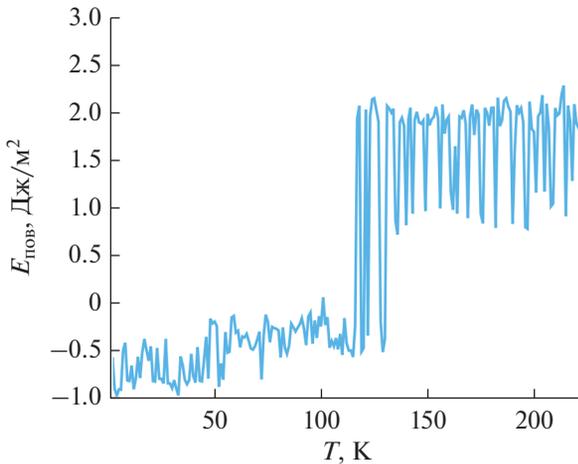


Рис. 9. Зависимость поверхностной энергии $E_{\text{пов}}$ от температуры T при кристаллографической ориентации (112).

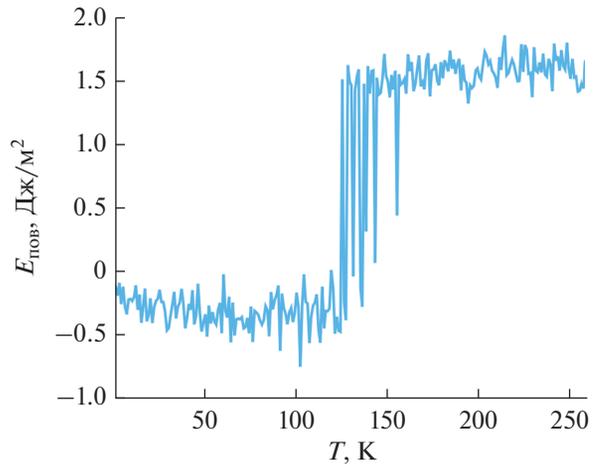


Рис. 10. Зависимость поверхностной энергии $E_{\text{пов}}$ от температуры T при кристаллографической ориентации (122).

На рис. 7 видим скачкообразное изменение поверхностной энергии при мартенситном переходе, проседание графика поверхностной энергии происходит из-за разной температуры фазового перехода в объемном материале и в пластинке. Колебания поверхностной энергии связаны с тепловыми флуктуациями.

При кристаллографической ориентации пластины (110), представленной на рис. 8, переход к аустенитному состоянию происходит при температуре 251 К.

При кристаллографической ориентации (112) и (122) на рис. 9 и 10 промежуточной фазы не наблюдается, однако можно видеть выраженный скачкообразный переход к аустенитной фазе при температуре в районе 125 и 150 К соответственно.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, получены результаты, которые подтверждают возможность изготовления нанопластин с различными характеристиками, а также модуляции их режимов работы путем выбора их кристаллографических ориентаций. Показано, что кристаллографическая ориентация поверхности пластины оказывает существенное влияние на температуру фазового перехода, а также на его характер. Также впервые получена зависимость поверхностной энергии от температуры при различных кристаллографических ориентациях поверхностей нанопластин TiNi.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

ФИНИНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 22-19-00783).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Трусов С.Н., Чернявские А.Г. // ЖТФ. 1996. Т. 66. № 11. С. 153.
2. Лохов В.А., Кучумов А.Г. // Рос. журн. биомеханики. 2006. № 3. С. 41.
3. Aviram A., Ratner M.A. // Chem. Phys. Lett. 1974. V. 29. № 2. P. 277.
4. Chernozatonskii L.A., Kosakovskaja Z.J., Fedorov E.A., Panov V.I. // Phys. Lett. A. 1995. V. 197. № 1. P. 40.
5. Антропов А.П., Зайцев Н.К., Рябков Е.Д. и др. // Тонкие химические технологич. 2021. Т. 16. № 2. С. 105.
6. Franklin A.D., Luisier M., Han S.J. et al. // Nano Lett. 2012. V. 12. № 2. P. 758.
7. Hills G., Lau C., Wright A. et al. // Nature. 2019. V. 572. № 7771. P. 595.
8. Zhang Y.L., Li J., To S. et al. // Nanotechnology. 2012. V. 23. P. 1063.
9. Budhia H., Kreith F. // Int. J. Heat Mass Transf. 1973. V. 16. № 1. P. 195.
10. Chang J., Sakai T., Saka H. // Philos. Magazine Lett. 2005. V. 85. № 5. P. 247.
11. Ko W.S., Grabowski B., Neugebauer J. // Phys. Rev. B. 2015. V. 92. № 13. Article No. 134107.
12. Kartsev A.I., Lega P.V., Orlov A.P. et al. // Nanomaterials. 2022. V. 12. P. 1107.
13. Nosé S. // J. Chem. Phys. 1984. V. 81. № 1. P. 511.
14. Hoover W.G. // Phys. Rev. A. 1985. V. 31. № 3. P. 1695.